

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 519.63

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-1-62-68>

Поступила в редакцию 11.01.2018

Received 11.01.2018

А. Н. Гуревский

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

## ОПТИМИЗАЦИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

**Аннотация.** Исследована спектральная согласованность двухслойной схемы с весами для нестационарного уравнения Шредингера. Показано, что семейство консервативных разностных схем на шеститочечном шаблоне на каждом шаге по времени эквивалентно последовательности двух сопряженных фазовых фильтров первого порядка с комплекснозначным полюсом. На основе численного анализа получены приближенные аналитические зависимости оптимальных значений параметров схемы с весами от соотношения шагов сетки, при которых достигается минимальная погрешность функции передачи соответствующего цифрового фильтра в заданном спектральном диапазоне. Показано, что среднеквадратичная погрешность функции передачи дискретных моделей с оптимальными параметрами на фиксированном частотном интервале многократно меньше соответствующих характеристик схемы четвертого порядка точности, которая обеспечивает наилучшую спектральную согласованность в лишь бесконечно узком спектральном диапазоне. Полученные результаты могут быть использованы при конструировании эффективных численных алгоритмов численного анализа как линейных, так и нелинейных задач для уравнений шредингеровского типа.

**Ключевые слова:** разностные схемы, уравнение Шредингера, спектральное разрешение, рекурсивный цифровой фильтр

**Для цитирования.** Гуревский, А. Н. Оптимизация спектральных характеристик разностных схем для нестационарного уравнения Шредингера / А. Н. Гуревский // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2019. – Т. 55, № 1. – С. 62–68. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-1-62-68>

A. N. Hureuski

*Belarusian State University, Minsk, Belarus*

## OPTIMIZING THE SPECTRAL CHARACTERISTICS OF THE FINITE-DIFFERENCE SCHEMES FOR THE UNSTEADY SCHRÖDINGER EQUATION

**Abstract.** The spectral consistency of the finite-difference theta-method for the unsteady Schrödinger equation is investigated. Optimal sampling parameters providing a minimum error for a given spectral range are obtained. It is shown that the optimized scheme provides a reduction (by a factor of 5–6) in the error of the approximate solution in comparison with the 4th order accuracy scheme. It is shown that the 4th order scheme provides the best spectral consistency only in the case if the spectral range length tends to zero. The conditions for equivalence between the finite-difference scheme and the scheme in the form of two first-order conjugated IIR filters are found. The obtained scheme is the best scheme in the class of conservative finite difference schemes for solving the Schrödinger equation. Practical issues arising in the process of implementing a numerical solution are considered. The obtained results can be efficiently used for solving linear and non-linear Schrödinger equations.

**Keywords:** finite-difference schemes, Schrödinger equation, spectral resolution, IIR filter

**For citation.** Hureuski A. N. Optimizing the spectral characteristics of the finite-difference schemes for the unsteady Schrödinger equation. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2019, vol. 55, no. 1, pp. 62–68 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2019-55-1-62-68>

**Введение.** В классической теории разностных схем оценки точности приближенных решений основаны на понятиях порядка аппроксимации и скорости сходимости [1]. Кроме того, широко распространен анализ амплитудно- и фазово-частотных характеристик разностных схем, с помощью которого удается получить дополнительные количественные и качественные критерии согласованности дискретных моделей. В частности, анализ согласованности разностных схем в терминах спектрального разрешения является более тонким инструментом, дающим более

подробную информацию о погрешности и открывающим дополнительные возможности улучшения точности [2]. В этой связи естественным представляется использование методов теории цифровой обработки сигналов для построения дискретных моделей с заданными спектральными свойствами.

Так, консервативные разностные схемы для нестационарного уравнения Шредингера при определенных условиях представимы в виде всепропускающего цифрового фильтра [3]. В работе [4] было показано, что оценки погрешности разностных схем могут быть получены на основе изучения спектральной согласованности амплитудных и фазово-частотных характеристик дифференциальной и разностной задач. Тем самым задача построения эффективных разностных методов может быть решена на основе дизайна соответствующего цифрового фильтра с заданными характеристиками.

В настоящей работе исследованы возможности улучшения спектральной согласованности дискретных моделей в виде двухслойных разностных схем и рекурсивных цифровых фильтров первого порядка для численного анализа нестационарного уравнения Шредингера. Получены приближенные аналитические выражения, описывающие взаимозависимость параметров дискретных моделей, обеспечивающих минимизацию погрешности их фазово-частотных характеристик в заданном спектральном диапазоне. Данные результаты являются обобщением исследований, опубликованных в статье [3]. Преимущество развитой ниже методики состоит в преодолении жестких ограничений на соотношение пространственно-временных шагов сетки, порождаемых представлением разностной схемы в виде пары сопряженных рекурсивных цифровых фильтров с чисто мнимым полюсом.

**Постановка задачи.** Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in [-L, L], \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями вида

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u(-L, t) = u(L, t) = 0. \quad (2)$$

Двухслойная разностная схема с весами для задачи (1), (2) на равномерной сетке  $\omega_x = \{x_k = -L + hk, k = \overline{1, N-1}, h = 2L/N, t_m = m\tau, m = 0, 1, \dots\}$  имеет вид

$$i \frac{\hat{U}_k - U_k}{\tau} = -\sigma \frac{\hat{U}_{k+1} - 2\hat{U}_k + \hat{U}_{k-1}}{h^2} - (1-\sigma) \frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{h^2}, \quad \hat{U}_0 = \hat{U}_N = 0. \quad (3)$$

Здесь  $U_k = U(x_k, t_m)$ ,  $\hat{U}_k = U(x_k, t_{m+1})$ . В работе [3] была показана связь между разностными схемами и рекурсивными цифровыми фильтрами. Так, передаточная функция цифрового фильтра, соответствующего разностной схеме (3), может быть представлена в виде

$$H_{FD}(\omega) = \frac{i - (1-\sigma) \frac{\tau}{h^2} (2 \cos \omega - 2)}{i + \sigma \frac{\tau}{h^2} (2 \cos \omega - 2)}, \quad -\pi \leq \omega < \pi. \quad (4)$$

Несложно видеть, что для консервативности схемы (3) требуется, чтобы  $|H_{FD}(\omega)| \equiv 1$ , необходимым и достаточным условием чего является тождество  $\operatorname{Re} \sigma = \frac{1}{2}$ . В связи с этим положим:

$$\sigma = \frac{1}{2} + \frac{i}{rq}, \quad r = \frac{\tau}{h^2}, \quad q = q(r). \quad (5)$$

При выполнении равенств (5) разностная схема будет консервативной, а соответствующий цифровой фильтр относится к классу всепропускающих фильтров. Отметим также, что при  $q(r) \equiv 12$  разностная схема (3) эквивалентна известной схеме четвертого порядка аппроксимации [1].

Передаточная функция цифрового фильтра, соответствующего дифференциальной задаче (1), (2), имеет вид

$$H(\omega) = e^{-ir\omega^2}. \quad (6)$$

Задача спектральной оптимизации разностной схемы (3) состоит в минимизации нормы разности функций (4) и (6) на основе соответствующего выбора параметра  $q = q(r)$  [4].

**Спектральное разрешение разностной схемы.** В качестве критерия оптимальности параметров дискретной модели рассмотрим условие минимума погрешности передаточной функции в заданном спектральном диапазоне. Рассмотрим среднеквадратичную погрешность функции передачи (4) на некотором фиксированном шаге по времени, например  $T = h^2$ . Многократное применение фильтра соответствует возведению его функции передачи в соответствующую степень. Также отметим, что

$$\frac{T}{\tau} = \frac{h^2}{\tau} = \frac{1}{r}.$$

Для оценки погрешности частотных характеристик дискретных моделей воспользуемся дискретным аналогом нормы:

$$\|\delta(\Omega, q, r)\| = \sqrt{\frac{1}{2\Omega} \int_{-\Omega}^{\Omega} \left| H(\omega, r)^{\frac{1}{r}} - H_{FD}(\omega, q, r)^{\frac{1}{r}} \right|^2 d\omega}, \quad 0 < \Omega < \pi, \quad (7)$$

где значение  $\Omega/\pi$  определяет относительный частотный диапазон, в котором вычисляется погрешность дискретной модели. Считая  $r$  параметром, найдем зависимость  $q = q(r)$ , которая минимизирует погрешность (7).

Для нахождения области допустимых значений параметра  $r$  заметим, что, в силу периодичности аргумента комплекснозначной функции передачи (6), достаточно рассматривать значения параметра  $r$ , удовлетворяющие неравенству  $0 < r < \frac{\pi}{\Omega^2}$ .

Результаты численного анализа для различных диапазонов спектральной согласованности представлены на рис. 1. Как видно, зависимости оптимального значения параметра  $q = q(r)$  являются монотонно убывающими функциями, максимальное значение которых растет и стремится к значению  $q = 12$ , когда ширина диапазона согласованности стремится к нулю. Таким образом, разностная схема четвертого порядка точности не может быть оптимальной ни для какого реального решения, имеющего отличную от нуля ширину спектра.

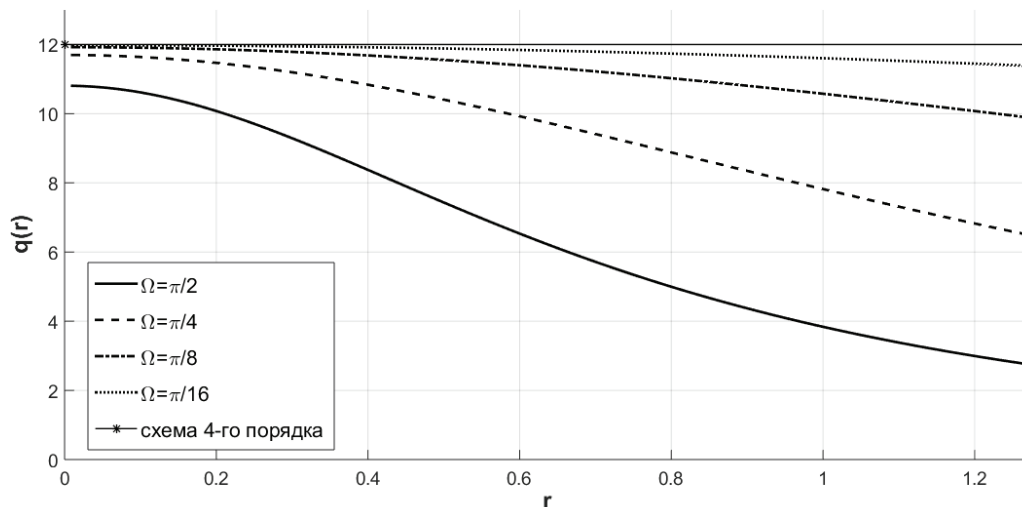


Рис. 1. Зависимости оптимального параметра  $q = q(r)$  схемы (3) от соотношения шагов сетки для различных диапазонов спектрального разрешения

Fig. 1. The optimal parameter  $q = q(r)$  of the scheme (3) vs. the step ratio for different spectral resolution ranges

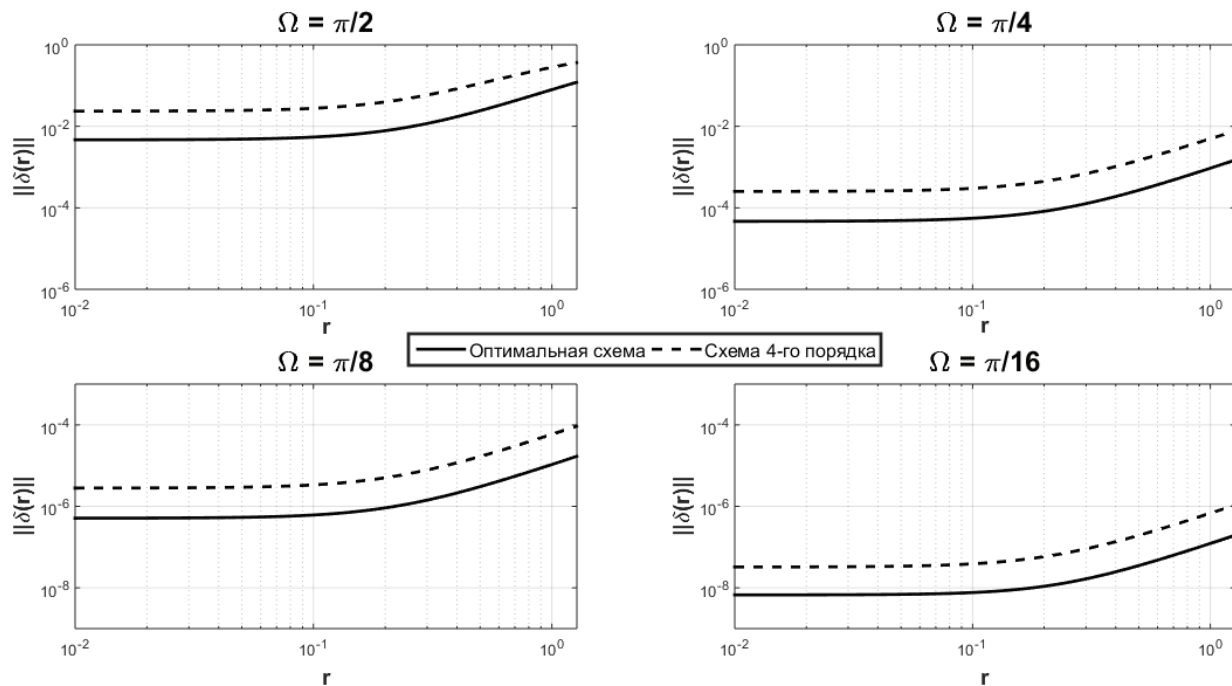


Рис. 2. Погрешность передаточной функции схемы четвертого порядка аппроксимации (штриховая линия) и схемы с оптимальными значениями параметров (сплошная линия)

Fig. 2. The root mean square error of the frequency response of the 4th order accuracy scheme (dashed lines) and the scheme with optimal parameters (solid lines)

Отметим, что полученные зависимости  $q = q(r)$  могут быть с высокой точностью приближены дробно-рациональными функциями. Например, были получены следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 q_{\Omega=\pi/2}(r) &= \frac{0,07577r^2 - 0,115r + 5,953}{r^2 - 0,009825r + 0,5507}; \\
 q_{\Omega=\pi/4}(r) &= \frac{0,01358r^2 - 0,08222r + 23,69}{r^2 - 0,004753r + 2,025}; \\
 q_{\Omega=\pi/8}(r) &= \frac{0,00212r^2 - 0,04529r + 93,8}{r^2 - 0,002677r + 7,867}; \\
 q_{\Omega=\pi/16}(r) &= \frac{0,001097r^2 - 0,05904r + 369,9}{r^2 - 0,00116r + 30,87}.
 \end{aligned} \tag{8}$$

Далее покажем, что при использовании оптимальных значений мнимой части весового множителя согласно (8) действительно можно получить значение погрешности существенно меньше по сравнению со схемой четвертого порядка аппроксимации. Результаты численного анализа, представленные на рис. 2, показывают, что для каждого спектрального диапазона при одинаковом соотношении шагов сетки схема с выбором оптимального значения параметра имеет погрешность в 4–6 раз меньше, чем схема четвертого порядка аппроксимации. Также отметим, что убывание погрешности при уменьшении шага по времени наблюдается только до некоторого критического значения параметра  $r = r_0 \approx 0,1$ . Поэтому с точки зрения рационального соотношения точности и вычислительных затрат имеет смысл выбирать значения параметра  $r$  в интервале  $0,2 \leq r \leq 0,5$ , в котором определяется оптимальное соотношение шагов сетки  $r = \frac{\tau}{h^2}$ .

Таким образом, полученная оптимальная схема в определенном смысле является наилучшей в классе консервативных двухслойных схем на шеститочечном шаблоне для уравнения Шредингера.

**Эквивалентное представление разностной схемы на основе рекурсивных цифровых фильтров.** Известно (см., напр., [5]), что передаточная функция всепропускающего фильтра первого порядка представляется в виде

$$H_1(\omega) = |p| \frac{e^{-i\omega} - \frac{1}{\bar{p}}}{e^{-i\omega} - p}, \quad (9)$$

где  $p$  – произвольное комплексное число. Следуя [3], сопряженным фильтром будем называть фильтр с передаточной функцией

$$H_1^*(\omega) = H_1(-\omega) = |p| \frac{e^{i\omega} - \frac{1}{\bar{p}}}{e^{i\omega} - p}. \quad (10)$$

Процедура реализации фильтра с передаточной функцией  $H_1^*(\omega)$  состоит в использовании стандартного алгоритма рекурсивного фильтра, реализуемого в обратном направлении дискретных отсчетов. Последовательному применению фильтров с передаточными функциями  $H_1(\omega)$  и  $H_1^*(\omega)$  соответствует фильтр с передаточной функцией  $\tilde{H}_F(\omega) = H_1(\omega)H_1^*(\omega)$ . Отметим, что для дифференциальной и разностной задач  $H(0) = H_{FD}(0) = 1$ . Следовательно, нормируя  $\tilde{H}_F(\omega)$  на константу  $\tilde{H}_F(0)$ , получим требуемую передаточную функцию:

$$H_F(\omega) = \frac{\tilde{H}_F(\omega)}{\tilde{H}_F(0)} = \frac{2\bar{p}(p-1)^2 \cos \omega - (\bar{p}^2 + 1)(p-1)^2}{2p(\bar{p}-1)^2 \cos \omega - (p^2 + 1)(\bar{p}-1)^2}. \quad (11)$$

Интересен тот факт, что в выражении (11) числитель является комплексным сопряжением знаменателя. Умножая числитель и знаменатель передаточной функции (4) на  $i$ , с учетом условия (5) и тождества  $1 - \sigma = \bar{\sigma}$  будем иметь

$$H_{FD}(\omega) = \frac{-2ir\bar{\sigma} \cos \omega - (1 - 2ir\bar{\sigma})}{2ir\sigma \cos \omega - (1 + 2ir\sigma)}. \quad (12)$$

Передаточная функция (12) обладает тем же свойством, что и (11): числитель является комплексным сопряженным по отношению к знаменателю. Нормируя коэффициент при  $\cos \omega$  в передаточных функциях (11) и (12) и приравнивая оставшиеся коэффициенты, получим

$$-\frac{(p^2 + 1)(\bar{p} - 1)^2}{2p(\bar{p} - 1)^2} = -\frac{1 + 2ir\sigma}{2ir\sigma}. \quad (13)$$

Упрощая равенство (13), имеем

$$\sigma = \frac{1}{2} + \frac{i}{qr} = -\frac{pi}{r(p-1)^2}. \quad (14)$$

Непосредственной подстановкой можно убедиться, что выполнение условия (14) приводит к тождественному равенству передаточных функций (11) и (12).

Таким образом, равенство (14) определяет условие эквивалентности разностной схемы (3), (5) и схемы цифровой фильтрации (11). Для полученных выше оптимальных значений  $q$  и  $r$  уравнение (14) позволяет определить значение полюса цифрового рекурсивного фильтра, эквивалентного спектрально оптимальной схеме (3), (5), (8).

Проанализируем далее, чем отличается построенная схема цифровой фильтрации с передаточной функцией (11) от аналогичной схемы, рассмотренной ранее в [3], с чисто мнимым значением параметра  $p$  – полюсом рекурсивного цифрового фильтра.

Пусть  $p = ip_0$ ,  $p_0 \in \mathbb{R}$ . Подставляя данное выражение в выражение (14) и приравнивая действительные и мнимые части соответствующих равенств, получим

$$\begin{cases} 2qp_0 = qr(1 - p_0^2) + 4p_0, \\ 2(1 - p_0^2) - 2p_0qr = 0. \end{cases} \quad (15)$$

Решая систему (15) относительно  $q$  и  $r$ , получим

$$\begin{cases} q = \frac{(1+p_0^2)^2}{2p_0^2}, \\ r = \frac{2p_0(1-p_0^2)}{(1+p_0^2)^2}. \end{cases} \quad (16)$$

Выражения (16) в точности повторяют условия эквивалентности разностной схемы (3), (5) и схемы фильтрации с чисто мнимым полюсом, полученные в [3]. Также можно убедиться, что выполняется следующее равенство:

$$\frac{1}{2}q^2r^2 - q + 2 = 0. \quad (17)$$

Таким образом, можно сделать вывод, что схема цифровой фильтрации с чисто мнимым полюсом оптимальна только для фиксированных значений  $r$  и  $q$ , которые однозначно определяются параметром  $p_0$ , согласно (16). Для остальных значений  $r$  зависимость  $q = q(r)$  из условия (17) не является оптимальной. С точки зрения теории цифровых фильтров схема фильтрации с чисто мнимым полюсом является частным случаем схемы фильтрации с передаточной функцией (11).

Для иллюстрации на рис. 3 изображены графики среднеквадратичной погрешности передаточных функций для схемы четвертого порядка (пунктирные линии), схемы фильтрации с чисто мнимым полюсом (штриховые линии) и разностной схемы (3), (5) с оптимальными параметрами (8) (сплошные линии). Как видим, схема фильтрации с чисто мнимым полюсом оптимальна при единственном значении  $r$ , найти которое можно из выражений (8) и (17). Также важно отметить, что схема фильтрации с чисто мнимым полюсом является корректной только при выполнении условия  $0 < r \leq \frac{1}{2}$ , а оптимальная схема (3), (5) с параметрами (8) таких ограничений не имеет.

Тем не менее, несмотря на более общий характер предложенной схемы (3), (5), (8), схема фильтрации с чисто мнимым полюсом обеспечивает четко локализованный минимум погрешности при соотношениях шагов сетки, которые с точки зрения минимизации вычислительных затрат представляются оптимальными [3].

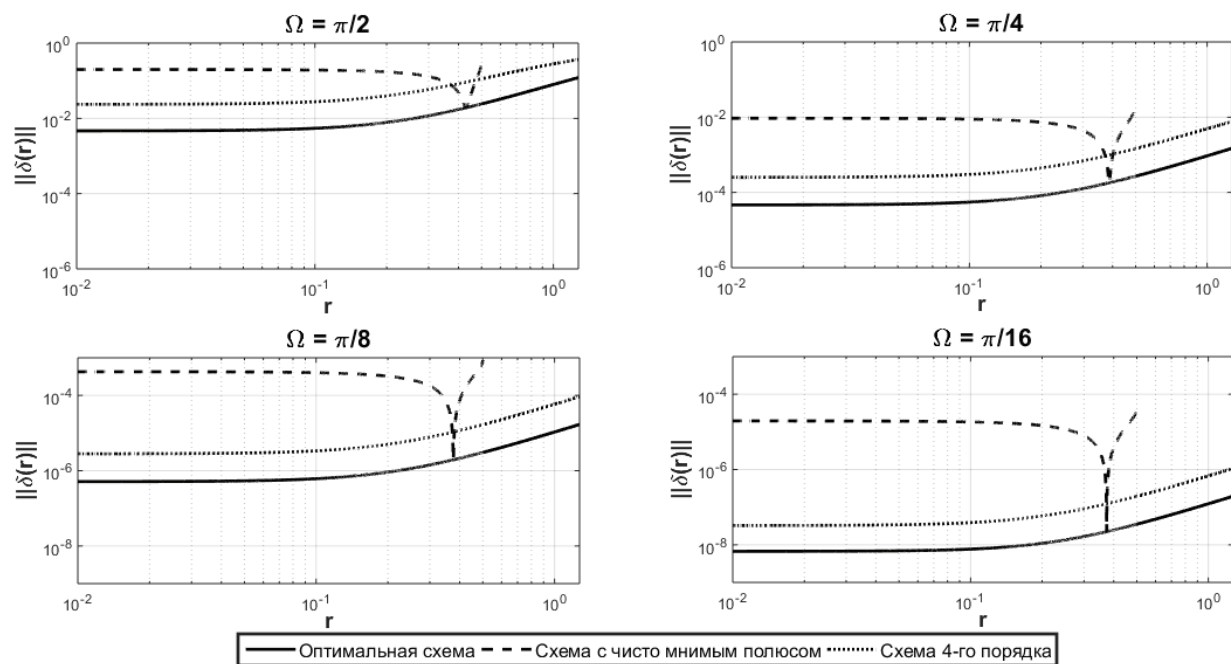


Рис. 3. Погрешность передаточной функции схемы четвертого порядка аппроксимации (пунктирные линии), схемы с оптимальными значениями параметров (сплошные линии), схемы фильтрации с чисто мнимым полюсом (штриховые линии)

Fig. 3. The root mean square error of the frequency response of the 4th order accuracy scheme (dotted lines), the scheme with optimal parameters (solid lines), the scheme with a pure imaginary pole (dashed lines)



**Заклучение.** Представленные выше результаты позволяют сделать вывод, что семейство консервативных разностных схем на шеститочечном шаблоне для нестационарного уравнения Шредингера на каждом шаге по эволюционной переменной эквивалентно паре сопряженных рекурсивных фильтров первого порядка. Спектральная оптимизация данной схемы дает возможность определить параметры дискретной модели, которые обеспечивают максимальную согласованность фазово-частотных характеристик дискретной и дифференциальной задач в заданном спектральном диапазоне. На основе численного анализа получены приближенные аналитические зависимости оптимальных параметров дискретной модели, которые для значений соотношения шагов сетки  $r = \frac{\tau}{h^2} = O(1)$  обеспечивают минимум спектральной ошибки в пределах заданного частотного диапазона. Оптимальное соотношение шагов сетки с высокой точностью описывается значениями оптимальных параметров схемы фильтрации с чисто мнимым полюсом фильтра. Следует отметить, что среднеквадратичная погрешность спектрально оптимальной схемы (3), (5), (8) в 5–6 раз меньше по сравнению со схемой четвертого порядка точности.

Представленные выше результаты могут быть использованы при построении эффективных численных алгоритмов как для линейных, так и нелинейных задач [3]. В частности, полученные оптимальные параметры дискретных моделей позволяют минимизировать вычислительные затраты для достижения заданной точности приближенного решения в пределах заданного спектрального диапазона. Развита методика построения численных алгоритмов на основе методов цифровой обработки сигналов также может быть использована для построения численных методов более высокого порядка точности.

**Благодарности.** Автор выражает благодарность профессору В. М. Волкову за внимание к работе и полезные замечания.

**Acknowledgments.** The author would like to thank Professor V. M. Volkov for his attention to the paper and some helpful advice.

### Список использованных источников

1. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
2. Lele, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution / S. K. Lele // J. Comput. Phys. – 1992. – Vol. 103, № 1. – P. 16–42. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-r](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-r)
3. Волков, В. М. Оптимизация компактных разностных схем спектрального разрешения для нестационарного уравнения Шредингера на основе методов цифровой обработки сигналов / В. М. Волков, А. Н. Гуревский, И. В. Жукова // Вестн. БГУ. – 2015. – № 3. – С. 84–89.
4. Волков, В. М. Спектральная согласованность разностных схем для уравнения теплопроводности / В. М. Волков, А. Н. Гуревский // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 7–14.
5. Сергиенко, А. Г. Цифровая обработка сигналов / А. Г. Сергиенко. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 768 с.

### References

1. Samarskii A. A. *The theory of Finite Difference schemes*. Moscow, Nauka Publ., 1989. 616 p. (in Russian).
2. Lele S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 1992, vol. 103, no. 1, pp. 16–42. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-r](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-r)
3. Volkov V. M., Gurevskii A. N., Zhukova I. V. Optimization of compact finite difference schemes with spectral-like resolution for the non-stationary Schrodinger equation on the base of digital signal processing methods. *Vestnik BGU. Seriya 1. Fizika. Matematika. Informatika = Vestnik BSU. Series 1: Physics. Mathematics. Informatics*, 2015, no. 3, pp. 84–89 (in Russian).
4. Volkov V. M., Hureuski A. N. Spectral-like resolution of finite-difference schemes for the heat conduction equation. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 7–14 (in Russian).
5. Sergienko A. G. *Digital signal processing*. Saint Petersburg, BHV-Petersburg Publ., 2011. 768 p. (in Russian).

### Информация об авторе

**Гуревский Алексей Николаевич** – старший преподаватель кафедры веб-технологий и компьютерного моделирования, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: gurevski@bsu.by

### Information about the author

**Aliaksei N. Hureuski** – Senior Lecturer of the Department Web-Technologies and Computer Modeling, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gurevski@bsu.by